## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Зайцевой Елены Александровны "Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соедигений и их изомеров",

хроматографии полярных органических соедигений и их изомеров", представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.02-аналитическая химия (1.4.2 по новой номенклатуре) и 02.00.04 — физическая химия (1.4.4 по новой номенклатуре)

Проблема априорного описания полярности и селективности неподвижных жидких фаз является одной из наиболее сложных и актуальных задач в хроматографии. Большинство существующих газожидкостной подходов основываются в той или иной мере на эмпирических данных. Целью настоящей разработка теоретического работы является нового метода межмолекулярных взаимодействий с использованием теории обобщенных зарядов и посредством этого оценка селективности и выбор неподвижных фаз для решения по полярных соединений методом газожидкостной задач разделению хроматографии.

**Новизна работы** заключается в использовании трехчленной модели, учитывающей неполярные и полярные взаимодействия, а также образование водородных связей для описания селективности и классификации неподвижных фаз в газовой хроматографии. Новой представляется часть работы относительно разработки критериев выбора неподвижных фаз для разделения геометрических изомеров.

Вполне очевидной является практическая значимость работы, поскольку выбор наиболее подходящей хроматографической колонки обеспечивает существенную экономию времени и оптимальное разделение для заданной смеси определяемых соединений.

Результаты работы Е.А. Зайцевой достаточно **хорошо апрбированы** в 20 печатных работах и доложены на многих представительных научных конференциях и симпозиумах.

По автореферату имеются несколько замечаний и пожеланий.

До настоящего времени в научной литературе нет устоявшегося однозначного определения полярности неподвижной фазы для газо-жидкостной хроматографии. Нередко, полярность неподвижной фазы путают с селективностью (например, полярность по Мак Рейнольдсу и селективность по Мак Рейнольдсу). Соответственно, хотелось бы видеть в работе авторское видение и определение полярности и селективности неподвижной фазы и обоснование правильности использования формулы 8 в качестве базовой для оценки полярности.

Возникает вопросы по использованию карт селективности, которые автором выражаются как зависимость полярности от гидрофильности. Известно, что, так называемая термодинамическая шкала полярности Новака, основана на измерении  $\Delta G_{CH2}$  отдельной метиленовой группы или инкрементов метиленовой группы  $\alpha(\mathrm{CH}_2)$  в удерживание гомологов линейных алканов, что отражает измерении гидрофобности в её общепринятом виде как коэффициента распределения веществ в системе 2-октанол/вода. Согласно Новаку, а также многочисленным работам отечественной хроматографической школы профессора Р.В. Головни, полярность неподвижной фазы для газо-жидкостной хроматографии обратно пропорциональна

 $\Delta G_{CH2}$ , и наоборот. Соответственно, величина гидрофильности должна быть пропорциональна полярности неподвижной фазы. В этом случае непонятно насколько информативной может быть зависимость между двумя связанными между собой величинами в предлагаемой карте селективности.

Тем не менее, сделанные замечания не снижают общего положительного впечатления от уровня работы. Диссератционная работа Зайцевой Елены Александровны «Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соедигений и их изомеров» соответствует требованиям пункта п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 с изменениями от 21 апреля 2016 г. №335, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 - аналитическая химия (1.4.2 по новой номенклатуре) и 02.00.04 — физическая химия (1.4.4 по новой номенклатуре).

Ведущий научный сотрудник кафедры физической химии, химический факультет, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет именно М. В. Ломоносова» (МГУ), доктор химических наук (02.00.02 – аналитическая химия), профессор (02.00.02 – аналитическая химия)

Нестеренко Павел Николаевич

г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 3 тел. 8-495-939-43-53

e-mail: p.nesterenko@phys.chem.msu.ru

« 30 » августа 2021 г.

Личную подпись Сом ЗАВЕРЯЮ:
Нач. отдела делопроизволства химического факультентий в делопроизволства делопроизволства делопрои в де